

Desarrollo de una herramienta de verificación para cálculos de difusión mediante COBAYA

Adrián Sabater Alcaraz, Gabriel Rucabado Rucabado, Diana Cuervo Gomez,
Nuria Garcia-Herranz.

Departamento de Ingeniería Nuclear, Universidad Politécnica de Madrid José
Gutiérrez Abascal nº2, 28006, Madrid. España

Introducción

El código COBAYA4 es un simulador de núcleo multi-escala que resuelve la ecuación de difusión 3D en multigrupos en geometría cartesiana y hexagonal[3]. Este código ha sido desarrollado en el Departamento de Ingeniería Nuclear desde los años 80[2] ampliando su alcance y funcionalidades de forma continua. Como parte de estos desarrollos es necesaria la verificación continua de que el código sigue teniendo al menos las mismas capacidades que tenía anteriormente. Además es necesario establecer casos de referencia que nos permitan confirmar que los resultados son comparables a los obtenidos con otros códigos con modelos de mayor precisión.

El desarrollo de una herramienta informática que automatice la comparación de resultados con versiones anteriores del código y con resultados obtenidos mediante modelos de mayor precisión es crucial para implementar en el código nuevas funcionalidades. El trabajo aquí presentado ha consistido en la generación de la mencionada herramienta y del conjunto de casos de referencia que han constituido la matriz mencionada. Para el establecimiento de los diferentes casos se han tenido que generar las librerías de secciones eficaces en el caso de que no estuvieran disponibles. Para los casos con un dominio de cálculo reducido se han calculado soluciones de referencia con códigos de transporte. En cálculos con dominio de mayor extensión (p.e mininúcleos o núcleos completos) se han tomado como referencia los resultados generados para *benchmarks* internacionales.

La mencionada herramienta permite establecer los criterios de comparación que se utilizar en cada caso y que han tenido que ser decididos en función del problema analizado. En general, los resultados obtenidos con COBAYA4 han sido satisfactorios. Han aparecido algunos casos en los que había discrepancias con la solución de referencia, en todos los casos debido a una incorrecta definición del problema en el archivo de entrada para COBAYA4.

Test de no regresión

Un test de no regresión es una herramienta común que permite someter a un control a un *software* y buscar errores en este después de someter al software a cambios o soluciones provisionales.[1].

El objetivo del test de no regresión es comprobar que los cambios realizados anteriormente no introducen nuevos errores. Uno de los motivos por los que utilizar una herramienta de no regresión es comprobar que los cambios de una parte del código no afecta a otras.[1]

Los test de no regresión se realizan siguiendo unos pasos determinados:

1. En primer lugar se selecciona un conjunto de soluciones de referencia con las que poder comparar los resultados. Estos supuestos tiene como objetivo chequear diferentes funciones del *software*.
2. Se generan los *inputs* para el código, en este caso COBAYA4, con los que se ejecutará el *software*.
3. Se ejecuta el input y se obtiene una solución.
4. Por medio de una herramienta, en este caso programa escrito en lenguaje php, se pueden comparar diferentes variables que se dan en el *output* del COBAYA4 con la solución de referencia.

Para cada uno de los casos se determinar un límite a partir del cual la solución de la herramienta de regresión se considera correcta. Como cada uno de los inputs tiene distintas condiciones el margen de error variará dependiendo de la complejidad del caso.

Todos los casos elegidos en esta parte del desarrollo de la herramienta de no regresión son casos neutrónicos, es decir, estacionarios a potencia cero donde la termohidráulica no tiene ningún efecto y por tanto el código no está acoplado. Esto permite analizar el correcto funcionamiento de COBAYA4 por si sólo sin las posibles interferencias de acoplamiento con otro código.

Como variables para comparar resultados se han tomado tres. La primera de ellas es la potencia nominal. Esta variable se tendrá en cuenta siempre que haya más de un elemento combustible o en caso de realizar un análisis *pin by pin* cuando se analiza un conjunto de barras como mínimo. La comparación con la potencia nominal se realiza por medio del error relativo en función de la solución de referencia en tanto por uno, $\frac{COBAYA4-REF}{REF}$. La distribución de potencia permite tener una visión del comportamiento del reactor más allá de que el reactor sea crítico y encontrar, en que zonas del reactor se está generando

la mayor potencia. Otra de las variables que se comparará es el factor de multiplicación, k_{eff} , esta variable indica el estado en que se encuentra el reactor, subcrítico, crítico y supercrítico. Y por último la concentración de boro crítico. Esta última variable solo se utiliza en caso de realizar un análisis de búsqueda de concentración de boro en el refrigerante que hace crítico el reactor.

Los casos a analizar por la herramienta de regresión son los siguientes:

Análisis nodal:

- 2D elemento combustible (*Pressurize Water Reactor*)PWR.
- 2D *colorset* con generación de (*Interface Discontinuity factor*)IDF.
- 2D elemento combustible junto a reflector.
- 2D fila de tres elementos combustibles y reflector.
- 2D núcleo completo.
- 3D núcleo completo.

Análisis *pin by pin*:

- 2D *pin-cell*.
- 2D *cluster* 3x3.
- 2D elemento combustible.
- 2D núcleo completo.
- 3D núcleo completo.

Para cada uno de los casos se determinará un umbral máximo para la diferencia entre la solución de referencia y la solución con el COBAYA4. Si el valor obtenido está por encima del umbral establecido el caso se considera fallado y por tanto hay algún problema con COBAYA4 que debe ser analizado. Este umbral depende del tipo de caso que se pretenda estudiar.

Herramienta de no regresión

Los casos se comparan utilizando un *software* desarrollado en lenguaje php con el fin de comparar toda la batería de casos preparados con sus correspondientes soluciones de referencia. En la siguiente figura se muestra un *input* para la herramienta de regresión en la que se comparan dos casos:

```

[DIRS]
INPUT      = ${HOME}/cobaya4/tests/non-regression
OUTPUT     = ${HOME}/cobaya4/tests/output
BENCHMARK  = ${HOME}/cobaya4/tests/non-regression
INSTALL    = ${HOME}/cobaya4

[THRESHOLD]
COND1 = 0.000001 0.0001 0.0001 0.0001 0.0001
COND2 = 0.00001 0.0001 0.0001 0.0001 0.0001

[COMMANDS]
C_SUB_nod = cobaya-SUBCHAN-NODAL
C_SIM_nod = cobaya-SIMULA-NODAL
C_CTF_nod = cobaya-COBRA3-NODAL
C_C3_nod  = cobaya-COBRA3-NODAL
C_SUB_pbp = cobaya-SUBCHAN-PBP
C_SIM_pbp = cobaya-SIMULA-PBP
C_CTF_pbp = cobaya-COBRA3-PBP
C_C3_pbp  = cobaya-COBRA3-PBP

[BENCHMARK]
B_pbp_2 = pbp/02-PWR-CLUSTER3x3-2D/cluster-3x3.txt
B_pbp_3 = pbp/03-PWR-FA-2D/FA-MOX.txt
[INPUTS]
I_pbp_2_2 = pbp/02-PWR-CLUSTER3x3-2D/cluster-3x3-4g.D
I_pbp_3_1 = pbp/03-PWR-FA-2D/FA-MOX-2G.D

[CASES_EXECUTE]
EXE_CTF_PBP_2_2 = C_CTF_pbp I_pbp_2_2
EXE_CTF_PBP_3_1 = C_CTF_pbp I_pbp_3_1

[CASES_COMPARE]
CMP40 = B_pbp_2 vs EXE_CTF_2_2 cond COND1
CMP41 = B_pbp_3 vs EXE_CTF_3_1 cond COND2

```

Figura 1: Ejemplo de input de la herramienta de no regresión

El *input* cuenta con diferentes partes:

1. En primer lugar aparece una parte denominada DIRS. En esta parte se introduce el *path* donde se encuentran los directorios del *input*, dónde se genera una carpeta *output* para almacenar los resultados, dónde se encuentran las soluciones de referencia y por último dónde se encuentra la carpeta del código.
2. En segundo lugar aparecen los diferentes umbrales de aceptación para dar por correcto un resultado, *THRESHOLD*. Cada umbral cuenta con cinco valores. El primero de los valores se corresponde con el umbral del factor de multiplicación. El segundo umbral se corresponde con la potencia nominal y el tercero se corresponde con la potencia axial, el cuarto umbral se corresponde con los límites para la potencia del núcleo colapsada en 2D y el último componente se corresponde con la potencia de todo el núcleo colapsada en un único elemento.
3. La tercera parte del *input*. *INPUTS*, se denomina *COMMAND*. En esta parte se indica los diferentes ejecutables con los que se lanzaran los distintos casos. Cada uno de los inputs se pueden ejecutar con diferentes ejecutables permitiendo

ver el efecto que tiene sobre el resultado las diferentes configuraciones que se dan al cambiar de código termohidráulico.

4. A continuación de *COMMAND* aparece *BENCHMARK*. En esta parte del input se indica donde se encuentran las soluciones de referencia. Las soluciones de referencia son archivos .txt que aparecen en cada una de las carpetas de los diferentes casos de regresión. Estos archivos cuentan con un valor referencia del factor de multiplicación o de concentración de boro crítico junto a un mapa de potencias nominales por elemento.

5. En la siguiente parte del input aparece el *path* de cada uno de los inputs que se van a ejecutar dentro del análisis de regresión.

6. En la siguiente parte del input, *CASE_EXECUTE*, aparece cada uno de los inputs que se van a ejecutar junto a su ejecutable. Como se ha dicho anteriormente, esto permite realizar diferentes combinaciones con los códigos termohidráulicos.

7. Por último en *CASE_COMPARE* se indica con cuál solución de referencia se compara el resultado obtenido con un ejecutable determinado bajo unas condiciones umbrales determinadas.

Los resultados obtenidos de los cálculos del error relativo de la potencia nominal se representan en función del resultado con una escala de colores para poder apreciar mejor la distribución de potencia. Un ejemplo se puede ver en la siguiente imagen:

```
# ANALYZING ::::::::::> nodal/05-FULLCORE-MOX-PART1-2D/MOX-2D-PART1-FixedTH-Lib-new-b-2g.D vs nodal/05-FULLCORE-MOX-PART1-2D/MOX-2D-PART1-FIXEDTH.txt <:::::::::
VARIABLE ==> RESULT THRESHOLD [ >=< ] MAX DIFF
-K_SEARCH ==> OK [0.00100000000 > 0.0005006600]
-Pow_IND ==> OK [0.10000000000 > 0.0445270617]
-Pow_AXI ==> OK [0.10000000000 > 0.0445270617]
-Pow_RAD ==> ERROR [0.10000000000 < 0.7457237564]
-Pow_TOT ==> ERROR [0.10000000000 < 0.7457237564]
```

Figura 2: Output herramienta de regresión

Como se puede ver, se utiliza una escala de colores para poder comprobar que los resultados son correctos. El verde se utiliza cuando los resultados son exactamente iguales a la solución de referencia. El color naranja se utiliza cuando los resultados son diferentes de los resultados del *benchmark*, pero no superan los valores umbrales. Por último es color rojo representa que el resultado obtenido por el código supera los valores límites permitidos.

Además, la herramienta de regresión cuenta con opciones para mostrar los mapas de potencia con escala de color.

Resultados del análisis de no regresión para el COBAYA4

En el análisis de regresión se pueden diferenciar dos tipos de umbrales de aceptación máximo. Uno par los casos más sencillos que cuentan con solución de un código de transporte, y otro para los casos de núcleo completo. En la siguiente tabla se muestran los umbrales máximos permitidos para este análisis de no regresión:

Casos	k_{eff} /Boro crítico	Error relativo potencia nominal
Dominio de cálculo reducido	1pcm	0,01
Dominio de mayor extensión	100pcm/10ppm	0,1

Cuadro 1: Umbrales máximos para el análisis de no regresión de COBAYA4

Una vez se tienen marcados todos los umbrales de aceptación para cada uno de los casos se procede al análisis de no regresión. Se analiza cada uno de los casos nombrados anteriormente tanto para los análisis nodales como para los análisis en *pin by pin*. En la siguiente tabla se muestra si cada uno de los casos y, si ha superado o no el *test*. En caso de no superar el test se indica en que parámetro se ha producido el error, en el factor de multiplicación(o boro crítico), en el error relativo de la distribución de potencia o en ambos parámetros simultáneamente.

Casos		k_{eff} /boro crítico	Error relativo
nodales	2D elemento combustible PWR.	✓	
	2D colorset con generación de IDF	✓	✓
	2D elemento combustible junto a reflector	✓	
	2D fila de tres elementos combustibles y reflector	✓	✓
	2D núcleo completo	✓	✓
	3D núcleo completo	✓	✓
<i>pin by pin</i>	2D <i>pin-cell</i>	✓	
	2D <i>cluster</i> 3x3.	✗	
	2D elemento combustible.	✓	✓
	2D núcleo completo.	✓	✗(distribución asimétrica)
	3D núcleo completo.	✓	✗ (distribución asimétrica)

Cuadro 2: Resultados del test de no regresión para el COBAYA4

Como se puede observar en los análisis nodales, todos los casos han superado el test de regresión sin ningún problema.

En el caso del análisis *pin by pin*, se puede ver como la situación es diferente. Para el caso 2D *cluster 3x3* el resultado del error de k_{eff} supera el valor límite de 1 pcm. Para los casos de núcleo completo en *pin by pin* el error es diferente. Aunque en ningún caso se superan los valores umbrales para la diferencias entre k_{eff} o boro crítico y el error relativo de la potencia nominal, la distribución de potencia no es simétrica cuando debería serlo. Esto se debe a un error en el cálculo de los IDF.

Conclusiones

Cada uno de los casos se ha seleccionado con un objetivo, estos objetivos van desde comprobar que se leen correctamente el *input* y la librería de datos nucleares hasta ver el efecto de las condiciones de contorno y los factores de discontinuidad.

Como se puede ver, los resultados que se obtienen en el análisis nodal cumplen con los criterios marcados para dar como correctos los resultados en todos los casos establecidos dentro de la batería de casos de no regresión.

Por otro lado, en los casos *pin by pin* estos resultados no han sido tan óptimos. En esta parte del análisis se ha podido demostrar, desde los casos más pequeños, que COBAYA4 presenta un problema con los IDF que hace asimétrica la distribución de potencia cuando debería ser simétrica. Además el análisis de no regresión ha permitido encontrar errores en las librerías de datos nucleares del *benchmark* en los elementos combustibles que cuentan con sistema de control.

Esto demuestra la eficacia que tiene de los test de no regresión para detectar problemas no solo en el código fuente del código con el que se está trabajando sino con elementos externos al código pero que forman parte de los datos de entrada.

Bibliografía

- [1] http://en.wikipedia.org/wiki/non-regression_testing.
- [2] C. Ahnert and J.M. Aragonés. Fuel management and core design core systems for pwr neutronic calculations. *Nuclear Technology*, 69:359, 1985.
- [3] Jose J. Herrero et al Javier Jimenez. Aplicación del código cobaya3 al análisis multiescala con acoplamiento neutrónico-termohidráulico en reactor pwr. 2005.